

## Die Kristallstrukturen von Romeit und Schneebergit.

Von

Otto Zedlitz, Tübingen.

**Zusammenfassung:** Romeit, Piemont und Schneebergit, Tirol, sind mit Atopit, Brasilien (nach W. T. Schaller Romeit) und den Pyrochloren isomorph. Die Gitterkonstanten betragen: für Romeit, Piemont,  $a = 10,261 \text{ \AA}$ , für Schneebergit, Tirol,  $a = 10,296 \text{ \AA}$ .

Die Arbeiten von F. Machatschki<sup>1)</sup> und von v. Gaertner<sup>2)</sup> über Atopit und Mauzeliit einerseits, über Loparit und Pyrochlor andererseits legten die Vermutung nahe, daß auch der Romeit und Schneebergit in Anbetracht der Ähnlichkeit in der Zusammensetzung und der kristallographischen Verwandtschaft in näheren Beziehungen zueinander und zu Atopit-Pyrochlor stehen könnten, als bisher auf Grund der Arbeiten von W. T. Schaller<sup>3)</sup> angenommen wurde.

In der vorliegenden Arbeit konnte gezeigt werden, daß die beiden genannten Mineralien mit dem Atopit von Brasilien und den Pyrochloren isomorph sind. Auch der Parameter der 48zähligen Sauerstoffatomlage ist für diese Mineralien innerhalb der Fehlergrenzen übereinstimmend mit dem Sauerstoffparameter der sonstigen Pyrochlore gefunden worden.

Zu der Erkenntnis, daß der Atopit von Miguel Burnier mit dem Romeit von Piemont identisch sei, kam schon W. T. Schaller auf Grund seiner chemischen Untersuchungen.

### I. Romeit von Piemont.

Die erste Stufe von St. Marcel, Piemont, die für die vorliegende Untersuchung erworben werden sollte und die der Firma Mineralien-Kontor F. Krantz in Bonn

1) F. Machatschki, Atopit und Mauzeliit, zwei nicht metamikte Minerale vom Typus  $X_2 Z_2 (O, OH, F)_7$  (Pyrochlor). Z. Krist. **73**, 159. 1930.

2) H. R. v. Gaertner, Die Kristallstrukturen von Loparit und Pyrochlor. N. Jb. Min. **61**, 1. 1930.

3) W. T. Schaller, Romeite. Min. Notes, Ser. **3**, 95. U. S. Geol. Surv. Bull. **610**. 1916.

als romeitführend geliefert worden war, bestand aus Manganepidot, Amphibol und Feldspat und wies kräftige Adern von einem gelbbraunen, isotropen, kristallinen Mineral, das für Romeit gehalten wurde, auf. Durch eine Pulveraufnahme an einer kleinen Probe konnte Prof. Machatschki das fragliche Mineral als Granat identifizieren. Die gefundene Gitterkonstante ( $a = 11,64 \text{ \AA}$ ) ließ auf Mangantongranat schließen, wie ein solcher ja auch von F. Pisani von St. Marcel, Piemont, beschrieben wurde. (C. R. **83**, 167.)

Solche Verwechslungen von gelbbraunem Granat und rotbraunem Romeit mögen in Mineralsammlungen öfters vorkommen. Sie sind in Parallele zu stellen mit den Verwechslungen des honiggelben Schneebergites mit dem gelbgrünen Granat am Vorkommen Schneeberg, Tirol, die bekanntlich dazu führten, daß der Schneebergit selbst einige Zeitlang als Glied der Granatgruppe genannt wurde. (Man vgl. z. B. P. Groth, Tabellar. Übersicht, 4. Aufl., 1898, 126 auf Grund der Untersuchungen von A. S. Eakle und W. Muthmann, Z. Krist. **44**, 583. 1895.)

Der Romeit von Piemont wurde von Damour<sup>1)</sup> erstmalig bearbeitet und ihm die Formel  $CaSb_2O_4$  beigelegt. Unser Material entstammt einer Stufe von St. Marcel in Piemont, die von Ward's National Science Establishment, Rochester, erworben wurde<sup>2)</sup>. Der Romeit saß in dünnen Krusten und Gängen ein- und angewachsen auf einer Stufe mit Manganepidot, Braunit, Quarz und Feldspat, also in der für dieses Vorkommen typischen Begleitung.

W. T. Schaller (l. c.) gibt ihm wie dem brasilianischen Atopit auf Grund seiner und einer von Hussak<sup>3)</sup> gemachten Analyse die Formel  $5CaO \cdot 3Sb_2O_5$ . Er hatte schon erkannt, daß er mit dem von Hussak als Atopit bezeichneten Mineral von Miguel Burnier, Brasilien, identisch ist. In dieser Formel sind  $Na$  und  $Mn$ , die für das  $Ca$  eintreten, nicht besonders genannt. Das Mineral enthält nach Schaller eine bemerkenswerte Menge von  $H_2O$  (1,39%), von dem dieser Autor wie beim Schneebergit annimmt, daß es vom Pulver während des Verreibens adsorbiert sei.

In Tabelle I ist das Ausmessungsergebnis eines Pulverdiagrammes des italienischen Romeits wiedergegeben. Der Film erwies sich schon bei roher Betrachtung als fast völlig identisch mit einem Vergleichsdiagramm des brasilianischen Atopits.

1) A. Damour, Sur la Roméine, nouvelle espèce minérale, de St. Marcel, Piemont. Ann. Min., (3) **20**, 247. 1841.

2) Genügend Material für eine neue zuverlässige Analyse stand nicht zur Verfügung.

3) E. Hussak, Über Atopit aus den Manganerzgruben von Miguel Burnier, Brasil. Zbl. Min. **1905**, 240.

Tabelle I.  
Pulverdiagramm des Romeits von Piemont.  
Cu-Strahlung. Kameradurchmesser 57,3 mm.

$2d-s$ $= 2\theta$	$2\theta$ korrig.	$\sin^2 \theta$	$\alpha$ $Q \cdot (h^2 + k^2 + l^2) \cdot 10^3$	$\beta$ $Q \cdot (h^2 + k^2 + l^2) \cdot 10^3$	Indizes	Inten- sität <sup>5)</sup> gesch.	Intensitäten berechnet		
							$u = 0,30$	$u = 0,31$	$u = 0,32$
— <sup>1)</sup>	—	—	—	—	$\alpha$ (411)	—	59	68	80
—	—	—	—	—	$\alpha$ (220)	—	0,2	0,06	0,8
26,2	25,8	0,04984	—	11 · 453	$\beta$ (311)	( $\frac{1}{2}$ )	—	—	—
27,5	27,1	0,05489	—	12 · 457	$\beta$ (222)	( $1\frac{1}{2}$ )	—	—	—
29,3	28,9	0,06231	11 · 566	—	$\alpha$ (311)	2	163	162	159
30,5	30,1	0,06742	12 · 561	—	$\alpha$ (222)	7	520	520	520
31,7	31,3	0,07277	—	16 · 455	$\beta$ (400)	( $\frac{1}{2}$ )	—	—	—
35,4	35,0	0,09042	16 · 565	—	$\alpha$ (400)	2	145	152	174
38,5	38,1	0,10653	19 · 561	—	$\alpha$ (331)	$\frac{1}{2}$	15	12	10
—	—	—	—	—	$\alpha$ (422)	—	10	11	13
45,4	45,0	0,14645	—	32 · 458	$\beta$ (440)	(2)	—	—	—
46,2	45,8	0,15142	27 · 561	—	$\alpha$ (333) $\alpha$ (511)	1	117 { 84 33	123 { 91 32	129 { 97 32
47,6	47,2	0,16028	—	35 · 458	$\beta$ (531)	( $\frac{1}{2}$ )	—	—	—
50,7	50,3	0,18062	32 · 562	—	$\alpha$ (440)	9	755	697	638
53,1	52,7	0,19700	35 · 563	—	$\alpha$ (531)	$1\frac{1}{2}$	143	136	127
53,8	53,4	0,20189	—	44 · 459	$\beta$ (622)	( $1\frac{1}{2}$ )	—	—	—
56,4 <sup>2)</sup>	56,0	0,22040	40 · 565	48 · 459	$\alpha$ (620) $\beta$ (444)	$\frac{1}{2}$	7 (50)	15 (60)	23 (70)
59,5	59,1	0,24323	43 · 565	—	$\alpha$ (533)	1	99	109	118
60,2	59,8	0,24849	44 · 565	—	$\alpha$ (622)	10	876	876	876
63,1	62,7	0,27068	48 · 564	—	$\alpha$ (444)	3	214	244	279
65,2	64,8	0,28711	51 · 563	—	$\alpha$ (711), $\alpha$ (551)	2	159 { 42 117	165 { 53 112	171 { 66 105
—	—	—	—	—	$\alpha$ (642)	—	1	2	6
70,8	70,4	0,33227	59 · 563	—	$\alpha$ (731), $\alpha$ (553)	3	248 { 207 41	232 { 188 44	219 { 167 52
72,9	72,5	0,34965	—	76 · 461	$\beta$ (662)	(2)	—	—	—
74,4	74,0	0,36218	64 · 566	—	$\alpha$ (800)	$2\frac{1}{2}$	227	221	223
74,9	74,5	0,36640	—	80 · 458	$\beta$ (840)	(1)	—	—	—
—	—	—	—	—	$\alpha$ (733)	—	10	11	14
—	—	—	—	—	$\alpha$ (660), $\alpha$ (822)	—	31 { 6 25	35 { 10 25	38 { 13 25
81,7	81,3	0,42352	75 · 565	—	$\alpha$ (751), $\alpha$ (555)	1	104 { 6 98	94,4 { 6,4 88	86 { 8 78
82,4	82,0	0,43041	76 · 566	—	$\alpha$ (662)	8	634	634	634
83,7	83,3	0,44166	—	96 · 461	$\beta$ (844)	(1)	—	—	—
84,8	84,4	0,45121	80 · 564	—	$\alpha$ (840)	7	539	569	586
86,8	86,4	0,46860	83 · 564	—	$\alpha$ (911), $\alpha$ (753)	1	120 { 66 54	116 { 69 47	118 { 76 42

1)–5) Anm. s. nächste Seite.

17\*

Tabelle I (Fortsetzung).

$2d-s$ $= 2\vartheta$	$2\vartheta$ korrig.	$\sin^2 \vartheta$	$\alpha$ $Q \cdot (h^2 + k^2 + l^2) \cdot 10^6$	$\beta$ $Q \cdot (h^2 + k^2 + l^2) \cdot 10^6$	Indizes	Intensität <sup>5)</sup> gesch.	Intensitäten berechnet		
							$u = 0,30$	$u = 0,31$	$u = 0,32$
90,0	89,6	0,49651	—	108 · 459	$\beta (10 \cdot 22), \beta (666)$	(1)	—	—	—
—	—	—	—	—	$\alpha (664)$	—	4	7	8
92,1	91,7	0,51483	91 · 565	—	$\alpha (931)$	1	116	133	150
95,4	95,0	0,54358	96 · 566	—	$\alpha (844)$	8	581	540	511
97,3	96,9	0,56007	99 · 565	—	$\alpha(933), (755), (771)$	1	106 { 26 26 54	110 { 33 20 57	117 { 43 15 59
—	—	—	—	—	$\alpha (10 \cdot 20), (862)$	—	5 { 4 1	3,5 { 3 0,5	2,1 { 2 0,1
102,6	102,2	0,60566	107 · 566	—	$\alpha (773), \alpha (951)$	1	145 { 81 64	146 { 72 74	148 { 62 86
103,2	102,8	0,61077	108 · 565	—	$\alpha (10 \cdot 22), \alpha (666)$	10	696 { 174 522	696 { 174 522	696 { 174 522
107,4 <sup>3)</sup>	107,0	0,64619	—	140 · 461	$\beta (10 \cdot 62)$	} 1½	81 + $\beta$	69 + $\beta$	57 + $\beta$
107,8	107,4	0,64953	115 · 564	$\alpha (953)$					
109,2	108,8	0,66113	—	144 · 459	$\beta (12 \cdot 00), (884)$	(1)	—	—	—
111,0	110,6	0,67592	(120 · 564)	147 · 460	$\beta (11 \cdot 51), (777)$	} 1	2 + $\beta$	1 + $\beta$	2 + $\beta$
—	—	—	—	—	$\alpha (10 \cdot 42)$				
113,4	113,0	0,69537	123 · 565	—	$\alpha (11 \cdot 11), \alpha (775)$	1	86 { 36 50	75 { 31 44	67 { 29 38
116,8	116,4	0,72232	128 · 564	—	$\alpha (880)$	3	223	215	217
118,9 <sup>4)</sup>	118,5	0,73858	131 · 5638	160 · 461	$\alpha (971, 955, 11 \cdot 31)$	} 4	188 { 66 56 + $\beta$	188 { 64 50 + $\beta$	181 { 63 42 + $\beta$
—	—	—	—	—	$\beta (12 \cdot 40)$				
—	—	—	—	—	$\alpha (866), (10 \cdot 60)$	—	7,1 { 0,1 7	8,6 { 0,6 8	8 { 1,5 6,5
125,2	124,8	0,7854	139 · 565	—	$\alpha (973), \alpha (11 \cdot 33)$	2	156 { 104 52	159 { 110 49	161 { 112 49
126,1	125,7	0,79177	140 · 565	—	$\alpha (10 \cdot 62)$	12	847	847	847
129,3	128,9	0,81398	144 · 565	—	$\alpha (12 \cdot 00), \alpha (884)$	9	545 { 91 454	561 { 86 475	562 { 80 482

$$Q_\alpha = 0,005642 \quad Q_\beta = 0,004586$$

$$a = 10,245 \text{ \AA.} \quad a = 10,248 \text{ \AA.}$$

- 1) Durch Primärfleck überdeckt; wurde in Drehkristallaufnahmen deutlich beobachtet.
- 2) Koinzidenz von  $\alpha (620)$  und  $\beta (444)$ .
- 3) Diffuse Doppellinie von  $\alpha (953)$  und  $\beta (10 \cdot 62)$ .
- 4) Koinzidenz von  $\alpha (971, 955, 11 \cdot 31)$  und  $\beta (12 \cdot 4 \cdot 0)$ .
- 5) Die Intensitäten der reinen  $\beta$ -Linien sind in Klammern gesetzt.

Alle Linien lassen sich nach Raumgruppe  $O_h^7$  indizieren, die beobachteten Intensitäten nach folgender Struktur, die 8 Moleküle  $(Ca, Na, Mn)_2Sb_2(O, OH, F)_7$  in der Elementarzelle verlangt, deuten:

16 $(Ca, Na, Mn)$	:	Punktlage	16b; $\frac{1}{8}\frac{1}{8}\frac{1}{8}, \frac{5}{8}\frac{5}{8}\frac{1}{8}$ usw. nach Wyckoff <sup>1)</sup>	
16 $Sb$		»	16c; $\frac{1}{8}\frac{3}{8}\frac{7}{8}, \frac{7}{8}\frac{1}{8}\frac{3}{8}$ usw.	»
48 $O$		»	48c; $u00; u + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$ ; usw.	»
8 $OH(F)$		»	8 f; $0\frac{1}{2}\frac{1}{2}, \frac{1}{2}0\frac{1}{2}$ usw.	»

Daraus geht hervor, daß weder die von Schaller noch die von Damour angegebene Romeitformel der Struktur gerecht werden kann, sondern daß die Zusammensetzung des frischen und reinen Romeits dem Idealtypus  $CaNaSb_2O_6OH$  nahekommen muß. Innerhalb dieser Formel ist die Möglichkeit für anderwertige Verhältnisse von  $(Ca + Mn) : Na$  und  $O : OH$  gegeben, wenn man sie allgemeiner hält und  $(Ca, Mn, Na)_2Sb_2(O, OH, F)_7$  schreibt. Jedoch geht, wie unten gezeigt wird, aus Valenzverteilungsgründen hervor, daß die 48zählige Anionenlage vornehmlich von  $O^{-2}$ , die 8zählige vor allem von  $OH^{-1}$ , eventuell  $F^{-1}$  besetzt sein muß.

Die Intensitätsberechnung unter Berücksichtigung der  $F$ -Kurven ergibt, wie Tabelle I zeigt, beste Übereinstimmung bei Annahme des  $O$ -Parameters zu 0,30a. Die  $F$ -Kurven für  $O$  und  $Ca$  wurden der Arbeit von Bragg und West<sup>2)</sup> entnommen, letztere unter Berücksichtigung des isomorphen Ersatzes:  $Ca$  durch  $Na$  und  $Mn$ , etwas modifiziert. Für  $Sb^{+5}$  wurde nach der Formel von Hartree<sup>3)</sup> folgender atomarer Streuungsverlauf berechnet (Tabelle II).

Tabelle II.  
Tabelle der atomaren  $F$ -Werte für  $Sb^{+5}$ .

$1/\lambda \cdot \sin \theta$	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9
$F_{Sb}$	42,0	36,0	30,2	26,2	23,0	20,8	18,6	16,6	14,9

Die Struktur entspricht so der von v. Gaertner (l. c.) für Pyrochlor, von F. Machatschki (l. c.) für Atopit (Romeit) von Brasilien, von E. Brandenberger<sup>4)</sup> für Koppit vom Kaiserstuhl angegebenen,

1) R. W. G. Wyckoff, The analytical Expression of the Results of the Theorie of Space-Groups. Carneg. Inst. Publ. Nr. 318. 1922.

2) W. L. Bragg and J. West, A technique for the X-Ray examination of crystal structures with many parameters. Z. Krist. 69, 118. 1929.

3) D. R. Hartree, The atomic structure factor in the intensity of reflexion of X-ray by crystals. Phil. Mag. 50. 1925.

4) E. Brandenberger, Die Kristallstruktur von Koppit. Z. Krist. 76, 322. 1931.

nur sind hier die Lagen von  $Ca(Na, Mn)$  und  $Sb$  vertauscht angenommen worden; damit tritt  $OH$  in die 8zählige Lage 8f (statt 8g) und der Parameter der 48zähligen Lage ändert sich von  $\frac{1}{5}$  auf  $\frac{3}{10}$ .

Die kubische Elementarzelle (Translationsgruppe  $I''$ ) hat eine Kantenlänge von 10,26 Å und enthält 8 Einheiten von der vereinfacht geschriebenen Formel  $X_2Z_2(O, OH, F)_7$ . Die Umgebung der Kationen ist derartig, daß jedes  $Ca(Na, Mn)$ -Atom von 8 Anionen in etwa rhomboedrischer Gruppierung umlagert ist. An den beiden Schnittpunkten der Polkanten jedes dieser wenig gestauchten »Rhomboider« liegen die Hydroxylionen; der Stauchung wegen haben sie von dem zentralen Kation einen kleineren Abstand als die übrigen umgebenden Kationen. Die Umgebung der Antimonatome durch je 6 Sauerstoffatome ist annähernd oktaedrisch.

Tabelle III.  
Pulveraufnahme von Romeit +  $NaCl$  (Piemont).  
Kameradurchmesser 57,3 mm.  $Cu$ -Strahlung.

$2d - s$ $= 2\vartheta$	$2\vartheta NaCl$ theoret.	$2\vartheta Romeit$ korrig.	$\sin^2 \vartheta$	$Q \cdot (h^2 + k^2 + l^2) \cdot 10^6$	$\alpha$ Indizes
29,1		28,86	0,06210	11 · 5645	311
30,45		30,17	0,06771	12 · 5642	222
32,0	31,74	—	—		
35,2		34,92	0,09002	16 · 5626	400
45,9	45,50	—	—		
50,65		50,24	0,18011	32 · 5628	440
57,0	56,54	—	—		
60,2		59,71	0,24782	44 · 5632	622
63,1		62,60	0,26990	48 · 5623	444
65,3		64,78	0,28695	51 · 5626	711, 551
70,8		70,23	0,33088	59 · 5609	731, 553
74,4		73,80	0,36050	64 · 5632	800
76,0	75,38	—	—		
82,3		81,63	0,42722	76 · 5634	662
84,8	84,10	—	—		
95,3		94,49	0,53914	96 · 5616	844
102,2	101,31	—	—		
103,2		102,3	0,60652	108 · 5616	10 · 22, 666
111,1	110,22	—	—		
116,7		115,8	0,71762	128 · 5607	880
125,8 <sup>1)</sup>		124,9	0,78607	140 · 5614	10 · 62
128,9		128,0	0,80783	144 · 5610	12 · 00, 884

$$Q_\alpha = 0,005624, \quad a = 10,261 \pm 0,008 \text{ \AA}.$$

1) Diffus.

Aus einem Pulverdiagramm mit  $NaCl$  als Vergleichssubstanz wurde die Gitterkonstante zu  $a = 10,261 \pm 0,008 \text{ \AA}$  berechnet (Tabelle III).

Die Idealformel  $CaNaSb_2O_6OH$  würde daher bei 8 Molekülen in der Elementarzelle ein spezif. Gewicht von 5,123 verlangen. Angegeben wird von Schaller als experimentell bestimmte Dichte: 5,074, von Damour: 4,713. Da von Schaller reinstes Material verwendet wurde, ist der erste Wert wahrscheinlicher.

Zum Vergleich seien die Gitterkonstanten der übrigen röntgenographisch untersuchten Minerale des Pyrochlortypus angeführt:

Pyrochlore: 10,331—10,376  $\text{\AA}$  (v. Gaertner)

Atopit (Romeit) von Ouro-Preto, Brasil:  $10,267 \pm 0,008 \text{ \AA}$   
(F. Machatschki)

Koppit, Kaiserstuhl:  $10,37 \pm 0,01 \text{ \AA}$  (E. Brandenberger).

Mit dem Parameterwert  $u = 0,30a$  ergeben sich folgende Atomabstände:

$Ca-O$	2,55 $\text{\AA}$	$O-O$	2,90 $\text{\AA}$ und 2,67 $\text{\AA}$
$Ca-OH$	2,23 $\text{\AA}$	$O-OH$	3,08 $\text{\AA}$
$Sb-O$	1,97 $\text{\AA}$		

Diese Werte stimmen sehr gut mit den sonstigen Erfahrungen über die Raumbeanspruchung der Ionen überein.

F. Machatschki hat darauf hingewiesen, daß man für den Atopit von Brasilien auf Grund der Struktur 1,6% Wasser oder 3,5% Fluor erwarten sollte; in der Analyse von Hussak war weder  $H_2O$  noch  $F$  angegeben. Die von F. Machatschki übersehenen neueren Analysen von W. T. Schaller geben sowohl für den Atopit (Romeit) von Brasilien als auch für den Romeit von Piemont Beträge an Wasser an, die dem von der Struktur geforderten Betrag nahekommen.

Kennzeichnend für die Pyrochlor-Romeit-Reihe ist ein gewisser Prozentsatz an  $F$  oder  $OH$ . Für die bisher bekannten Glieder dieses Typus fordert nicht nur der allgemeine Valenzausgleich, sondern auch die Valenzverteilung im Gitter im Sinne von L. Pauling<sup>1)</sup> das Vorhandensein von einwertigen Anionen<sup>2)</sup>.

Betrachten wir den Idealromeit von der Zusammensetzung  $CaNaSb_2O_6OH$ ! Jedem  $O$ -Atom in der 48zähligen Punktlage gehören 2 ( $Ca, Na$ )

1) L. Pauling, The principles determining the structure of complex ionic crystals. Sommerfeld-Festschrift, Leipzig 1928. J. Am. chem. Soc. **51**, 1010. 1929.

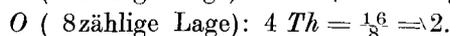
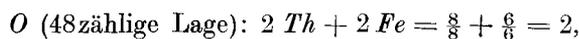
2) Dem entsprechen auch die Untersuchungen von Joly (Ann. sc. l'ec. norm. sup. **6**, 164. 1877) und von P. J. Holmquist (Bl. geol. Inst. of Upsala **3**, Nr. 5. 1896), die gezeigt haben, daß  $Ca_2Nb_2O_7$  und  $Ca_2Ta_2O_7$  nicht mehr kubisch, sondern rhombisch kristallisieren.

[8-Koordination] und 2 *Sb* [6-Koordination] an. Deshalb entfällt darauf die folgende Valenzmenge:

$$\frac{3}{8} + \frac{5}{3} = \frac{9 + 40}{24} \sim 2.$$

Jedem *OH*-Ion (Punktlagen 8f) sind 4 (*Ca*, *Na*) zugeordnet. Valenzmenge daher  $\frac{8}{8} \sim 1$ .

Die geringfügigen Abweichungen von 2 bzw. 1 sind auch in andern Strukturen beobachtet worden und widersprechen Paulings Valenzverteilungsgesetz nicht. In Pyrochloren, die kein *F* und *OH* enthalten, müßte (*Ca*, *Na*) durch 4wertige Kationen ersetzt werden. So ist die Verbindung *Th<sub>2</sub>Fe<sub>2</sub>O<sub>7</sub>* im Sinne der Valenzverteilungsregel als Pyrochlor denkbar:



Eine andere Frage ist aber, ob der kleine Abstand *Ca*—*QH* eine Substitution von *OH* durch *O* zuläßt.

Der Name Atopit darf wegen der chemischen und strukturellen Identität mit dem Romeit wohl fallen gelassen werden; die beiden Mineralien unterscheiden sich in einwandfreiem Zustand höchstens durch den größeren oder kleineren Gehalt an *Mn* und *Fe*. Aus Prioritätsgründen müßte der Name Romeit bevorzugt werden.

## II. Schneebergit.

Die Formel des Schneebergits ist nach W. T. Schaller *CaSbO<sub>3</sub>* bzw.  $2 \text{ CaO} \cdot \text{Sb}_2\text{O}_3 + 2 \text{ CaO} \cdot \text{Sb}_2\text{O}_5$ . Auf Grund einer direkten Sauerstoffbestimmung durch Zersetzung des Minerals im Wasserstoffstrom und Wägung des sich bildenden Wassers kam er nämlich zu der Auffassung, daß *Sb* zur einen Hälfte in dreiwertiger Stufe, zur andern in fünfwertiger Stufe vorhanden sein müsse.

Danach wäre die Abgliederung des Schneebergites als neue Mineralgattung berechtigt gewesen. Bevor die einzige vollständige quantitative Analyse des Schneebergits vorlag, betrachtete A. Brezina<sup>1)</sup> den Schneebergit als dimorph mit Romeit, den man häufig für tetragonal ansah und P. Groth<sup>2)</sup> hielt es damals für möglich, daß der Schneebergit identisch mit dem Atopit sein könnte. Auf Grund der Untersuchungen von Schaller ist später in den Mineralogischen Tabellen von Groth und Mieleitner der Schneebergit als selbständige Spezies aufgeführt.

1) A. Brezina, Über ein neues Mineral, den Schneebergit. Verh. geol. Reichsanst. Wien 1880, S. 313.

2) P. Groth, Übersicht der Mineralien 1891, S. 81.

Zuerst stand für die röntgenographische Untersuchung nur eine kleine Schneebergitstufe aus dem Mineralog. Institut der Universität Graz zur Verfügung. Der Schneebergit saß in winzigen Oktaedern in Hohlräumen einer aus Kupferkies, Zinkblende, Quarz und gelbgrünem Granat bestehenden Stufe vom Schneeberg in Tirol. Um die Stufe mit dem seltenen Mineral nicht zu zerstören, konnte nur ein kleiner Kristall für eine Drehaufnahme abgetrennt werden. Diese Aufnahme wurde unter Drehung um die [110]-Achse ausgeführt und erwies sich auf den ersten Blick als völlig identisch mit einer Vergleichsaufnahme von Romeit, Miguel Burnier. Man erhält für den Identitätsabstand I. A. in der Richtung [110] folgende Werte (Tabelle IV).

Tabelle IV.

Drehkristallaufnahme um [110].<sup>1)</sup>

Kameradurchmesser: 64,7 mm, Cu-Strahlung.

a) Romeit, Miguel Burnier.			b) Schneebergit, Tirol.		
Nr.	Schichtlinien- abstand 2e	I. A.	Nr.	Schichtlinien- abstand 2e	I. A.
I.	14,2	7,16	I.	14,0	7,25
II.	30,5	7,20	II.	30,1	7,28
III.	54,5	7,14	III.	52,0	7,35

Daraus:  $a = 10,2 \pm 0,1 \text{ \AA}$ .       $a = 10,3 \pm 0,1 \text{ \AA}$ .

Hofrat Prof. Tornquist stellte dann noch eine Schneebergitstufe aus der Sammlung des Geolog.-Mineralog. Institutes der Techn. Hochschule in Graz zur Verfügung, wofür ihm der beste Dank ausgesprochen werden soll. Diese Stufe zeigte den Schneebergit neben gelbgrünem Granat, mit dem der Schneebergit früher bekanntlich häufig verwechselt wurde, und Zinkblende in kleinen Nestern in Gips.

Der Stufe konnte eine kleine Menge kristallinen Schneebergites für die Herstellung einer Pulveraufnahme entnommen werden, die sich ebenfalls hinsichtlich der Linienlage und der Intensitäten als nicht unterscheidbar von den Romeitfilmen erwies. Deshalb kann auf eine Wiedergabe der Filmvermessungsdaten verzichtet werden.

Dasselbe Pulver wurde dann noch mit Steinsalz als Vergleichssubstanz aufgenommen. Die Ausmessung dieses Filmes führte für den Schneebergit zur Gitterkonstante  $a = 10,296 \pm 0,008 \text{ \AA}$  (Tabelle V).

Die Gitterkonstante des Schneebergits ist somit um einige Promille größer als die von Romeit, Brasilien ( $a = 10,267 \text{ \AA}$ ) und von Romeit,

Tabelle V.  
 Pulveraufnahme von Schneebergit +  $NaCl$ .  
 $Cu$ -Strahlung. Kameradurchmesser 57,3 mm.

$2d - s$ $= 2\vartheta$	$2\vartheta NaCl$ theoret.	$2\vartheta$ Schnee- bergit, korrig.	$\sin^2 \vartheta$	$Q \cdot (h^2 + k^2 + l^2) \cdot 10^6$	$\alpha$ Indizes
30,15		30,05	0,06720	12 · 5600	222
34,85	34,74	—	—		
34,85		34,72	0,08903	16 · 5564	400
45,7	45,50	—	—		
50,35		50,12	0,17941	32 · 5606	440
56,85	56,54	—	—		
59,7		59,38	0,24533	44 · 5576	622
62,7		62,37	0,26812	48 · 5586	444
64,85		64,52	0,28490	51 · 5586	711, 551
66,65	66,31	—	—		
70,50		70,17	0,33038	59 · 5599	731, 553
75,7	75,38	—	—		
81,7		81,33	0,42463	76 · 5587	662
84,5	84,10	—	—		
89,4		88,97	0,49101	88 · 5579	664
94,1	90,50	—	—		
94,6		94,14	0,53610	96 · 5585	844
101,8	101,31	—	—		
102,5		102,0	0,60396	108 · 5592	10 · 22, 666
110,65	110,22	—	—		
115,8		115,25	0,71329	128 · 5573	880
120,3	119,68	—	—		
124,9		124,26	0,78147	140 · 5582	10 · 62

$$Q_a = 0,005586, \quad a = 10,296 \pm 0,008 \text{ \AA}.$$

Piemont ( $a = 10,261 \text{ \AA}$ ). Daß dies tatsächlich der Fall ist, ergibt sich aus der Beobachtung, daß in den Filmen mit Steinsalz bei Romeit die Linien Steinsalz  $\alpha$  (440) und Romeit  $\alpha$  (666),  $\alpha$  (10,22) deutlich getrennt sind, indem sich die Romeitlinie nach dem größeren Glanzwinkel hin verschiebt, während beim Schneebergit der innere Rand der Schneebergitlinie fast über den äußeren Rand der Steinsalzlinie fällt (vgl. Tabelle III und V).

Auf Grund der vorliegenden Untersuchung muß man annehmen, daß auch die Zusammensetzung des Schneebergites sich der Formel  $(Ca, Na, Fe)_2Sb_2O_6(OH)$  sehr nähern muß. Es ist daher wahrscheinlich, daß die von W. T. Schaller gefundenen 1,67% Wasser nicht erst beim Pulvern

adsorbiert wurden, sondern dem Schneebergitmaterial von Anfang an eigen waren. Für eine neue sorgfältige Analyse, die wünschenswert wäre, dürfte gegenwärtig das nötige einwandfreie Schneebergitmaterial kaum mehr zu beschaffen sein.

Es ist mir eine Freude, Herrn Prof. Dr. F. Machatschki für viele Anregungen und sein stetes, überaus hilfsbereites Interesse an der vorliegenden Arbeit auch an dieser Stelle herzlich danken zu dürfen!

Mineralogisches Institut Tübingen, im Oktober 1934.

Eingegangen am 9. November 1934.

---